

UNTERSUCHUNGEN ÜBER DEN ZUSAMMENHANG ZWISCHEN MORPHOLOGIE UND STRUKTUR BEI DEN CÖLESTIN- KRISTALLEN DES TRANSILVANISCHEN BECKENS (RUMÄNIEN)

von

J. IMREH

Mineralogisches Institut, Univ. Bolyai-Babes, Cluj.

Eingegangen am 15.9. 1973

RÉSUMÉ

Dans le premier chapitre l'auteur présente la morphologie des cristaux, fondée sur l'étude de 874 cristaux recueillis de 5 occurrences. On a établi 48 combinaisons différentes des 17 formes déterminées. On constatait la domination des cristaux formés des 5 formes.

On a présenté les valeurs P et les valeurs D, T, S relatives à la grandeur des formes: D désigne la dominance, T la grandeur de transition et S la grandeur subordonnée des formes.

L'importance des zones a été établie au moyen des valeurs D_z et des valeurs g du P. Niggli. L'ordre d'importance des zones est présenté dans le tableau 5.

Les habits des cristaux sont présentés dans la dernière partie du premier chapitre.

Le second chapitre traite la structure de la célestine, la succession des plans réticulaires, la période d'identité, le principe de la construction etc. pour les formes étudiées par l'auteur.

Dans le troisième chapitre est présenté la liaison entre la morphologie et la structure réticulaire.

Se fondant sur l'étude des cristaux recueillis l'auteur est arrivé à la conclusion, que l'hypothèse du P. Niggli, en ce qui concerne l'importance des suites réticulaires avec les distances minimales entre les particules constitutives, est inapplicable à la célestine.

Dans l'étude de la corrélation l'auteur se fonde sur le principe de la construction des plans réticulaires et sur la période d'identité entre les plans réticulaires. Tant que la période d'identité entre les plans réticulaires et leur densité réticulaire est plus grande, tant s'augmente aussi l'importance des formes dans la morphologie des cristaux.

En prenant en considération ces critères, on a établi l'importance suivante des formes principaux: {011}, {001}, {210}, {101}, {100}, {102}, {111}, {110} et {211}.

Einleitung

Im Studium der Beziehung zwischen Morphologie und Struktur gibt es zwei wichtige Seiten, die äussere Form und die Gitterstruktur.

Die erste Seite des Problems wurde in den früheren Arbeiten über Cölestin des Siebenbürger Beckens vernachlässigt. Die Forscher, die sich mit den Cölestin-Kristallen beschäftigten (Benkő (1885); Koch (1888, 1889); Szádeczky (1889); Stoicovici und Gliszczinski (1936); Zimányi (1888); Szádeczky (1923); haben im allgemeinen wenige Kristalle untersucht. Selbst in den Fällen, wo die Zahl der untersuchten Kristalle etwas grösser war, wurden die statistischen Daten der Formen nicht zusammengestellt. Wir besitzen nicht einmal Daten bezüglich der Persistenzwerte der Formen.

Die älteren Forscher (Koch, Benkő, Zimányi) haben sich das Problem der statistischen Daten überhaupt nicht gestellt, solche Forschungen wurden zu ihrer Zeit nicht gemacht.

Die neueren Forschungen haben diese so wichtige Seite der Morphologie der Kristalle auch nicht betont. Die statistischen Daten der Formen erlauben eine genaue Beschreibung der Morphologie und durch diese, eine vollständigere Kenntnis einer Seite unserer Beziehung. In dieser Hinsicht müssen wir aber erwähnen, dass nicht einmal die modernen Untersuchungen die Erfordernisse einer umfassenderen Kenntnis der Kristallformen erfüllen.

Es gab drei statistische Hauptwerte: P (Persistenzwert) und g (Besetzungszahl) von P. Niggli (1941) in die kristallographischen Untersuchungen eingeführt, bzw. der Wert G (Grössenzahl) von V. M. Goldschmidt (1923).

Der P -Wert charakterisiert die Persistenz in Kombinationen, g die Wichtigkeit der Zonen und G die Grösse der Formen.

Von der Formel $\sum_1^z (nH)_z$, mit welcher man die g -Werte berechnet, kommt man zur Schlussfolgerung, dass sie auf der Persistenz der Formen basieren.

Die Persistenz gibt uns ein getreues Bild, was die Häufigkeit der Formen betrifft, aber vom Gesichtspunkt des Habitus oder der Bedeutung der Zonen ist es nicht gleichgültig, ob eine Form in dominanter, oder untergeordneter Grösse auftritt, selbst im Falle einer Form mit maximaler Persistenz.

Goldschmidts G -Wert scheint auf den ersten Blick das Problem der Grössenverhältnisse der Formen zu lösen. Diesen Wert berechnet man mit der Formel:

$$G = g \frac{100}{3n},$$

wo $g = 3i + 2k + l$. Mit i bezeichnet man die dominierenden Flächen, mit k die Übergangsflächen, mit l die kleinen Flächen. Goldschmidt's G -Wert ist unbestreitbar ein Schritt vorwärts im Studium der Morphologie der Kristalle. Er hat aber den Nachteil, dass die drei Kategorien von Formen (dominante, übergangs- und untergeordnete) durch einen einzigen Wert gekennzeichnet sind, was eine Trennung der Grösse nach und eine genauere Charakterisierung der Formen nicht ermöglicht. G -Werte sagen zum Beispiel nicht, auf wieviel Kristallen eine Form in dominanter oder untergeordneter Grösse auftritt. Dieses ist auch die Ursache, dass G -Werte nicht mehr verwendet werden.

Niggli hat diese Unzulänglichkeiten festgestellt und eine neue Einteilung aufgestellt, indem er die Formen auf Grund der Persistenz in

fünf Kategorien gruppierte (Leitformen, Nebenleitformen usw.). Diese Aufteilung Niggli's hat wiederum den Nachteil, dass sich auch sie auf den Persistenzwerten aufbaut, die Grösse der Formen wurde auch in diesem Fall nicht berücksichtigt.

Unserer Ansicht nach ist Goldschmidt's Idee gut, aber nicht in ihrer ursprünglicher Form. Für die Charakterisierung der Grössenbeziehungen der Formen haben wir drei neue kristallographische Werte eingeführt: D , T und S , welche mit folgenden Formeln berechnet wurden:

$$D = d \frac{100}{n} \quad T = t \frac{100}{n} \quad S = s \frac{100}{n},$$

D = Dominationswert; T = Übergangswert (Transitionswert); S = Unterordnungswert (Subordinationswert); d , t , s = Anzahl der Kristalle, auf denen die betreffende Form in dominierender, mittlerer, oder in untergeordneter Grösse erscheint; n = Anzahl der Kristalle, bei denen (abgesehen von der Grösse: ob dominierende, mittlere oder untergeordnete) die betreffende Form gefunden wurde. Die Art und Weise, wie die Werte aus den obigen Formen bestimmt werden, und die Vorteile dieser Werte, wurden ausführlich in früheren Arbeiten dargestellt (I m r e h 1964).

Mit Hilfe dieser Werte kann die Morphologie der untersuchten Kristalle vollständig charakterisiert werden und damit wurde die erste Seite der Beziehung auf eine feste Grundlage gestellt.

Was die zweite Seite der Beziehung die Innenstruktur-betrifft, diese ist bekannt und wir werden in einem gesonderten Kapitel ausführlich darauf zurückkommen.

Im weiteren werden wir zuerst die Morphologie der studierten Cölestin-Kristalle behandeln, dann gehen wir zum Verhältnis zwischen Morphologie und innerer Struktur über.

I. Das morphologische Studium der Cölestin-Kristalle

Weil wir die Cölestin-Kristalle des Siebenbürgischen Beckens vom statistischen Gesichtspunkt aus ungenügend kennen, beruht unsere Arbeit auf dem von uns an 5 Orten gesammelten Material (Cluj, Baci, Copaceni, Cheia, Sandulesti (I m r e h, 1957). Dieses Material lieferte uns 874 für Kristallographische Untersuchungen geeignete Kristalle. Auf diesen Kristallen haben wir folgende Formen bestimmt:

a {100}	I {016}	j {0.1.14}	m 110	y {122}	x {135}
c {001}	Y {017}	d {102}	n 120	θ {124}	T {5.2.12}
o {011}	q {018}	l {104}	z 111	f {113}	

Diese Formen sind in den an der Tabelle 1. gezeigten Kombinationen erschienen.

Tabelle 1.

	a	c	m	o	l	d	x	y	z	n	I	Y	e	f	T	j	θ	Anzahl der Krist.
1	-	c	m	o	l	d	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	270
2	-	c	m	o	l	d	-	y	-	-	-	-	-	-	-	-	-	56
3	-	c	m	o	l	d	x	y	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
4	-	c	m	o	l	d	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	46
5	-	c	-	o	l	d	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	17
6	-	c	-	o	l	d	-	-	z	-	-	-	-	-	-	-	-	14
7	-	c	m	o	l	d	-	-	z	-	-	-	-	-	-	j	-	1
8	-	c	-	o	l	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	7
9	-	c	m	o	l	d	-	-	z	-	-	-	-	-	-	-	-	5
10	-	c	-	o	-	d	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
11	-	c	m	o	-	d	-	-	-	-	I	-	-	-	-	-	-	15
12	-	-	m	o	-	d	-	-	-	n	-	-	-	f	-	-	-	21
13	a	c	m	o	-	d	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	79
14	-	c	m	o	l	d	-	y	-	n	-	-	-	-	-	-	-	1
15	-	c	m	o	l	d	-	-	-	n	-	-	-	-	-	-	-	1
16	-	c	m	o	l	d	-	-	-	n	-	-	-	-	-	-	-	30
17	-	c	m	o	l	d	-	y	-	n	-	Y	q	-	-	-	-	1
18	-	c	m	o	l	d	-	y	-	n	-	-	-	-	-	-	-	35
19	-	c	m	o	l	d	-	-	-	n	-	Y	q	-	-	-	-	3
20	-	c	m	o	-	d	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
21	-	c	m	o	l	d	-	y	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
22	-	c	m	o	l	-	-	y	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
23	a	c	m	o	l	d	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	14
24	-	-	m	o	-	d	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	19
25	a	c	m	o	l	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	5
26	a	-	m	o	l	-	-	-	-	n	-	-	-	-	-	-	-	3
27	-	-	m	o	l	d	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
28	-	c	m	o	-	d	-	y	-	-	-	-	-	-	-	-	-	38
29	-	-	m	o	-	d	-	y	-	-	-	-	-	-	-	-	-	5
30	-	c	-	o	-	d	-	y	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
31	-	c	m	o	-	d	-	-	-	n	-	-	-	-	-	-	-	6
32	-	c	m	o	-	d	-	y	z	n	-	-	-	-	-	-	-	2
33	a	c	m	o	l	d	-	y	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
34	-	c	m	o	l	d	-	-	-	-	-	-	-	-	T	-	-	9
35	-	c	m	o	l	d	-	y	z	-	-	-	-	-	-	-	-	1
36	-	c	m	o	l	d	-	y	-	-	-	-	-	-	T	-	-	1
37	-	c	m	o	l	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	13
38	-	c	m	o	l	d	-	-	z	n	-	-	-	-	-	-	-	4
39	-	-	m	o	l	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2
40	-	-	m	o	l	d	-	y	z	n	-	-	-	-	-	-	-	2
41	-	-	m	o	l	d	-	-	z	n	-	-	-	-	-	-	-	1
42	-	-	m	o	l	d	-	-	z	-	-	-	-	-	-	-	-	1
43	-	-	m	o	l	-	-	-	z	n	-	-	-	-	-	-	-	1
44	-	c	m	o	l	d	-	y	z	n	-	-	-	-	-	-	-	2
45	-	c	-	o	l	d	-	y	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
46	-	-	m	o	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
47	-	-	m	o	l	d	-	-	-	n	-	-	-	-	-	-	-	1
48	-	-	m	o	l	-	-	y	z	n	-	-	-	-	-	-	-	1

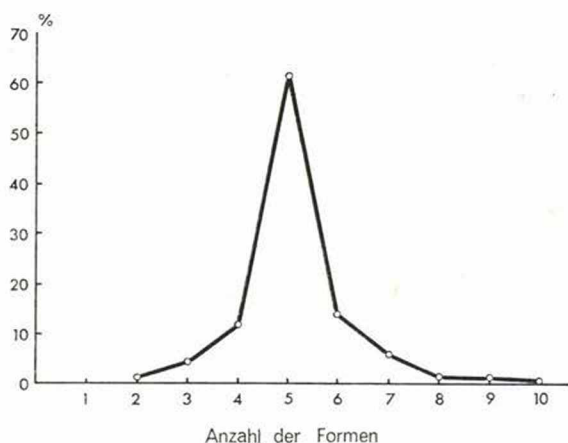


Abb. 1.

Aus dieser Tabelle bzw. Tabelle 2. geht die Dominierung der aus 5 Formen gebildeten Kristalle hervor, eine Regelmässigkeit, die auch von andern Forscher bei der Cölestin-Kristallen gefunden wurde. Sowie wie uns von dieser Kombinationen entfernen, fällt die Zahl der Kristalle. Abbildung 1 bringt graphisch die Werte aus Tabelle 2.

Tabelle 2.

Anzahl der Formen	Anzahl der Kristallen	%
2	1	0,11
3	36	4,11
4	108	12,44
5	539	61,65
6	131	14,98
7	52	5,94
8	3	0,33
9	3	0,33
10	1	0,11

Die Persistenzwerte der Formen sind in der Tabelle 3 enthalten.

Auf Grund der Persistenzwerte können die Formen in 3 Kategorien eingeteilt werden. Die erste Gruppe enthält Formen mit hoher und höchster Persistenz ($P = 70,93 - 100$), in der zweiten Gruppe sind die Formen mit Werten zwischen 11,67 und 18,65 zusammengefasst, während zur dritten Gruppe Formen mit minimaler Persistenz gehören

($P = 0,11-4$). Aus diesem Gesichtspunkt sind die Formen der ersten Gruppe am bedeutendsten: $\{011\}$, $\{102\}$, $\{110\}$, $\{001\}$ und $\{104\}$. Die hohe Persistenz dieser Formen erklärt das Vorherrschen der aus fünf Formen gebildeten Kristalle.

Tabelle 3.

	Symbol	Index	Persistenzwert
1	a	(100)	11,67
2	c	(001)	93,02
3	o	(011)	100,00
4	d	(102)	95,20
5	l	(104)	70,93
6	m	(110)	94,28
7	z	(111)	4,00
8	j	(0.1.14)	0,11
9	n	(120)	13,15
10	y	(122)	18,65
11	x	(135)	0,34
12		(124)	2,06
13	I	(016)	1,72
14	f	(113)	1,72
15	Y	(017)	0,47
16	q	(018)	0,47
17	T	(5.2.12)	1,14

Tabelle 4.

	Symbol	Index	Dominierende		Mittlere		Untergeordnete		n
			d	D	t	T	s	S	
1	a	(100)	19	18,64	41	40,19	42	41,17	102
2	c	(001)	271	33,33	145	17,83	397	48,84	813
3	o	(011)	583	66,70	242	27,69	49	5,61	874
4	I	(016)	—	—	5	33,33	10	66,66	15
5	Y	(017)	—	—	—	—	4	100,00	4
6	q	(018)	—	—	—	—	4	100,00	4
7	j	(0.1.14)	—	—	—	—	1	100,00	1
8	d	(102)	193	23,20	392	47,12	247	29,68	832
9	l	(104)	84	13,54	142	22,91	394	63,55	620
10	m	(110)	224	27,18	313	37,99	287	34,83	824
11	n	(120)	4	3,48	10	8,69	101	87,83	115
12	z	(111)	1	2,86	3	8,57	31	88,57	35
13	y	(122)	9	5,52	16	9,82	138	84,66	163
14	f	(113)	—	—	—	—	15	100,00	15
15	x	(135)	—	—	—	—	3	100,00	3
16	δ	(124)	—	—	—	—	18	100,00	18
17	T	(5.2.12)	—	—	—	—	10	100,00	10

Die Grössenverhältnisse der Formen sind in der Tabelle 4 wiedergegeben. Aus dieser Tabelle entnehmen wir, dass es 9 Formen gibt, die auch in dominierender Grösse auftreten: {001}, {011}, {110}, {102}, {100}, {104}, {122}, {120}, und {111}. Auf dem ersten Blick stellt man einen Parallelismus zwischen Persistenz- und Dominationswerten fest. Die Formen mit Persistenzwerten der ersten Gruppe haben auch relativ grössere Dominationswerte, ausgenommen {100}. Betrachten wir aber den allgemeinen Charakter der Formen, so ändert sich das Bild. Eine einzige Form hat dominanten allgemeinen Charakter {011}, weil $D = 66,70$ alle anderen Werte übersteigt ($T = 27,69$; $S = 5,61$). Die Formen {102} und {110} haben im allgemeinen Übergangscharakter ($T = 47,12$; $T = 37,99$), während die Formen {001} und {104} durchwegs einen untergeordneten Charakter aufweisen, ($S = 48,84$; $S = 63,55$) *obwohl sie hohe Persistenzwerte haben*. Trotzdem verleiht ihnen die Tatsache, dass diese Formen auch in dominierender Grösse auftreten können, eine bestimmte Bedeutung, selbsterständlich im Verhältnis zu ihren D -Werten.

Die bedeutenderen Zonen

Die bedeutenderen Zonen der von uns untersuchten Kristalle sind:

[100]	mit den Formen	{001}, {011}, {016}, {017}, {018}, {0.1.14}
[211]	mit den Formen	{120}, {011}, {111}, {102}, {113}, {124}, {135}, {5.2.12}
[111]	mit den Formen	{110}, {011},
[011]	„ „ „	{122}, {100}, {011}, {111},
[110]	„ „ „	{001}, {110}, {113}, {111},
[010]	„ „ „	{001}, {102}, {104}, {100},
[221]	„ „ „	{110}, {102}, {122},
[001]	„ „ „	{100}, {110}, {120},
[210]	„ „ „	{001}, {120}, {122}, {124},
[441]	„ „ „	{110}, {104}, {124}, {5.2.12},
[201]	„ „ „	{122}, {102}.

Um die Bedeutung der Zonen zu bestimmen, haben wir in der kristallographischen Untersuchung die Werte D_z eingeführt (10), welche die Summe der Werte D aus der entsprechenden Zone darstellen. Die Werte D_z erhalten wir selbstverständlich nur aus Zonen, wo sich wenigstens zwei Formen mit D -Werten befinden.

Die Bedeutung und der Nutzen der D_z -Werte im Vergleich mit andern zur Bestimmung der Wichtigkeit der Zonen, wurde in früheren Arbeiten (Imreh, 1957) behandelt.

In Tabelle 5 bringen wir die D_z -Werte. Ebenfalls in diese Tabelle haben wir die Werte q aufgenommen, welche W. Schilly (1933) für die Cölestin-Kristalle der Welt berechnet hat.

Tabelle 5.

Wichtigkeits- ordnung	Symbol d. Zonen		D_z -Wert	Wichtigkeits- ordnung	Symbol d. Zonen		g -Wert
	neu	alt			neu	alt	
1	[100]	[100]	100,03	1	010	010	691
2	[111]	[211]	96,24	2	100	100	609
3	[122]	[111]	93,88	3	011	011	518
4	[011]	[011]	93,73	4	120	110	470
5	[010]	[010]	88,71	5	111	211	463
6	[120]	[110]	63,37	6	001	001	421
7	[121]	[22']	55,90	7	122	111	385
8	[001]	[001]	49,30	8	121	221	371
9	[110]	[210]	42,33	9	101	201	281
10	[241]	[441]	40,72	12	241	441	223
11	[101]	[201]	28,72	14	101	201	205

Aus der Tabelle geht hervor, dass zwischen den Werten D_z und g für die ersten 8 Zonen keine grösseren Unterschiede bestehen, ausgenommen die Zonen [010] und [111], wo die Differenz 4 und 3 Einheiten in der Wichtigkeitsordnung beträgt.

Wichtiger ist die Tatsache, dass zwischen den Hauptzonen [100] und [011] die Differenz der D_z - und g -Werte nur eine Einheit beträgt. Weiter ist die Feststellung wichtig, dass die Zone [001] sowohl auf Grund der D_z -Werte, als auch der g -Werte eine geringe Bedeutung hat, nämlich der Ordnung 8 bzw. 6. Auf dieses Verhalten der Zone [001] werden wir noch zurückkommen.

Der Habitus der Kristalle

Die von uns untersuchten Kristalle zeigten folgende Habitus-Typen:

1. Prismatische Kristalle, in der Achse a verlängert, mit dem Symbol:

$$A_a [100]$$

Im Symbol (Chudoba, 1930) ist A = axial; a = verlängert in der Achse a ; [100] = dominierende Zone.

2. Tafelartige Kristalle nach {001} und in Richtung der Achse b -verlängert, mit dem Symbol:

$$P_{(001)}^b [010], [100] \quad (P = \text{Planar}).$$

3. Tafelige Kristalle nach {001}, in Richtung der a -Achse verlängert, mit dem Symbol:

$$P_{(001)}^a [100], [010].$$

4. Tafelige Kristalle nach {011}, in Richtung der Achse a verlängert, mit dem Symbol:

$$P_{(011)}^a [100], [110].$$

5. Isometrische Kristalle entstanden durch die Dominanz in Gleichgewicht der Formen $\{011\}$ und $\{102\}$. Symbol:

$$I_{(011), (102)} [100], [010].$$

6. Isometrische Kristalle mit den dominanten Formen $\{110\}$ und $\{011\}$. Symbol:

$$I_{(110), (011)} [100], [001].$$

Von diesen sechs Habitus-Typen sind die ersten drei am häufigsten.

II. Gitterstruktur des Cölestins

Die Struktur des Cölestins wurde von James und Wood (1925) bestimmt. Die Raumgruppe ist D_{2h}^{16} , (Pnma). Die Dimensionen der Elementarzelle sind: $a_0 = 8,36 \text{ \AA}$; $b_0 = 5,36 \text{ \AA}$; $c_0 = 6,84 \text{ \AA}$. Das aus den strukturellen Daten hervorgehende Achsialverhältnis ist: 1,558:1:1,280. Wir bemerken also, dass das Achsialverhältnis für a_0 doppelt so groß ist, wie der vorher aus der äusseren Form der Kristalle bestimmte Wert. Aus diesem Grund geben wir im folgenden für die kristallographischen Symbole zwei Bezeichnungen, die neue und in geraden Klammern die alte.

Da in der elementaren Zelle 4 Moleküle enthalten sind, wurden 4 Stellungen für Sr und 4 für S festgestellt. Die von James und Wood für die Sr und S festgestellten Koordinaten erschweren beträchtlich die kristallographischen Berechnungen. Sie können aber vereinfacht werden, indem man $5/16$, $1/4$, $1/3$ als Ausgangswerte nimmt und dann folgende Koordinaten erhält:

$$\begin{aligned} \text{Sr } [[000]]; & \left[\left[\frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{6} \right] \right]; \quad \left[\left[\frac{1}{8} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \right] \right]; \quad \left[\left[\frac{5}{8} \ \frac{1}{2} \ \frac{2}{3} \right] \right] \\ \text{SO}_4 & \left[\left[\frac{1}{4} \ \frac{1}{2} \ 0 \right] \right]; \quad \left[\left[\frac{3}{8} \ 0 \ \frac{2}{3} \right] \right]; \quad \left[\left[\frac{7}{8} \ 0 \ \frac{1}{2} \right] \right]; \quad \left[\left[\frac{3}{4} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{6} \right] \right] \end{aligned}$$

Der Sauerstoff setzt sich um den Schwefel nach einem Koordinations-Tetraeder, so dass das Zentrum der Gruppe SO_4 der Stellung des Schwefels entspricht.

Diese Koordinaten sind der Ausgangspunkt für alle Berechnungen die Struktur des Cölestins betreffend. Mit ihrer Hilfe kann man die Aufeinanderfolge und den Abstand zwischen den Gitterebenen einer Folge von Ebenen zwischen $h_0 k_0 l_0$ und $h_1 k_1 l_1$, die Besetzung der Ebenen mit Partikeln, die Identitätsperiode, die Entfernung zwischen den Teilchen in Richtung jedweder Gittergerade, usw. verfolgen.

Die Gitterebenen

Da wir die Position der Gruppe SO_4 und Sr kennen, können wir die Aufeinanderfolge der Serien irgendeiner Gitterebene berechnen. Die Arbeitsformel ist:

$$d_{1-8} = hx + ky + lz,$$

wo x , y und z die Koordinaten von Sr bzw. der Gruppe SO_4 sind. Indem wir die Werte von x , y , z einsetzen, erhalten wir:

Sr	SO_4
$d_1 = h \ 0 + k \ 0 + l \ 0$	$d_5 = h \frac{1}{4} + k \frac{1}{2}$
$d_2 = h \frac{1}{2} + l \frac{1}{6}$	$d_6 = h \frac{3}{8} + l \frac{2}{3}$
$d_3 = h \frac{1}{8} + k \frac{1}{2} + l \frac{1}{2}$	$d_7 = h \frac{7}{8} + l \frac{1}{2}$
$d_4 = h \frac{5}{8} + k \frac{1}{2} + l \frac{2}{3}$	$d_8 = h \frac{3}{4} + k \frac{1}{2} + l \frac{1}{6}$

Ersetzen wir die Indizes in diesen Formeln, so erhalten wir alle Kennzeichen der Gitterebenen.

Anschließend bringen wir die Daten der Serien der Gitterebenen $\langle 001 \rangle$

SrSO_4	SrSO_4	SrSO_4	SrSO_4
0	$\frac{1}{6}$	$\frac{3}{6}$	$\frac{4}{6}$
(1)	(2)	(1)	

$$I_{001} = 44,81 (\text{\AA})^2; \quad d_{001} = 6,84 \text{\AA}; \quad d_{001 \min} = \frac{1}{6}d = 1,14 \text{\AA}; \quad q_1 = 1; \quad q_2 = 1$$

Der Wert d wurde mit folgender Formel berechnet:

$$d_{hkl} = \frac{V_{(abc)}}{I},$$

wobei V das Volumen des elementaren Parallelepipeds ist und I die Inhalt des Elementarparallelogramms darstellt. Den Wert von I berechnen wir mit der Formel:

$$I_{hkl} = \sqrt{h^2 b^2 c^2 + k^2 a^2 c^2 + l^2 a^2 b^2},$$

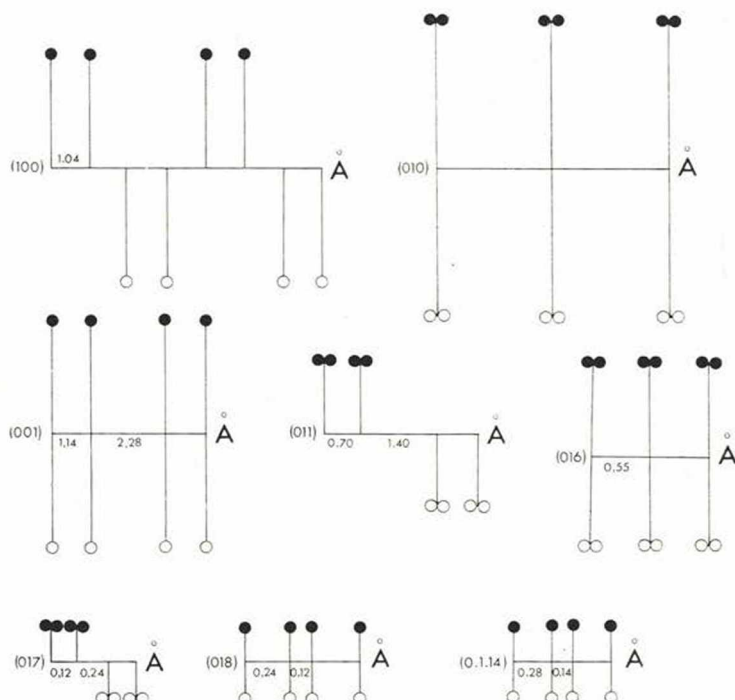


Abb. 2.

Stellen wir die Aufeinanderfolge der Gitterebenen graphisch dar (nach N i g l i), so erhalten wir die Abbildungen 2 und 3. Auf der Abszissen-Achse haben wir die Abstände zwischen den Gitterebenen dargestellt, auf der Ordinaten-Achse Sr mit ausgefüllten Kreisen und SO_4 mit Kreisen am Ende von Linien, deren Länge proportional mit dem Wert L ist. Der Wert L wurde mit folgender Formel berechnet:

$$L = \frac{q_1 A_1 + q_2 A_2}{I_{hkl}},$$

wo q die Zahl der Partikel darstellt, welche in einem elementaren Parallelogramm enthalten sind, während A_1 bzw. A_2 das Atomgewicht des Sr und der SO_4 Gruppe bedeuten.

Aus der graphischen Darstellungen geht hervor, dass die Ebenen der Serie $\{001\}$ doppelt belastete ungemischte Ebenen sind.

$\langle 100 \rangle$

Sr	Sr	SO_4	SO_4	Sr	Sr	SO_4	SO_4
0	$\frac{3}{24}$	$\frac{6}{24}$	$\frac{9}{24}$	$\frac{12}{24}$	$\frac{15}{24}$	$\frac{18}{24}$	$\frac{21}{24}$
(1)	(1)	(1)	(1)	(1)	(1)	(1)	(1)

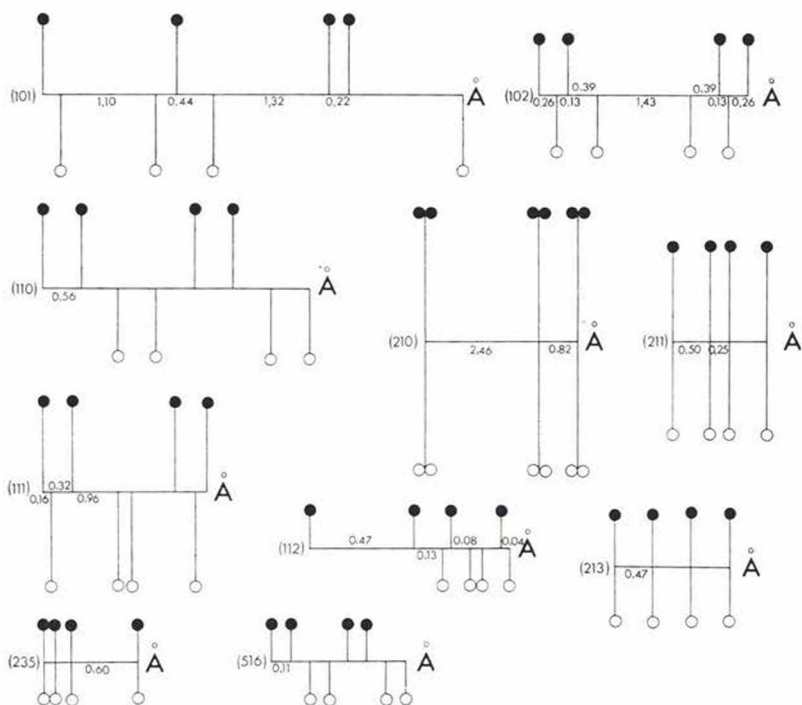


Abb. 3.

$$I_{100} = 36,66 (\text{\AA})^2; \quad d_{100} = 8,36 \text{\AA}; \quad d_{010} \text{ min} = 1,04 \text{\AA}; \quad q = 1.$$

Einfach belastete, einfache Ebene.

$\langle 010 \rangle$

$$\begin{array}{ccc} 2\text{SrSO}_4 & 2\text{SrSO}_4 & 2\text{SrSO}_4 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{2}{2} \\ (1) & (1) & \end{array}$$

$$I_{100} = 57,18 (\text{\AA})^2; \quad d_{010} = 5,36 \text{\AA}; \quad d_{010} \text{ min} = 2,68 \text{\AA}; \quad q_1 = 2; \quad q_2 = 2$$

Vierfach belastete gemischte Ebene.

$\langle 011 \rangle$

$$\begin{array}{cccc} 2\text{Sr} & 2\text{Sr} & 2\text{SO}_4 & 2\text{SO}_4 \\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{3}{6} & \frac{4}{6} \\ (1) & (2) & (1) & \end{array}$$

$$I_{011} = 72,65 (\text{\AA})^2; \quad d_{011} = 4,22 \text{\AA}; \quad d_{011} \min = 0,70 \text{\AA}; \quad q = 2$$

Doppelt belastete einfache Ebene.

$\langle 016 \rangle$

$$\begin{array}{ccc} 2\text{SrSO}_4 & 2\text{SrSO}_4 & 2\text{SrSO}_4 \\ 0 & \frac{3}{6} & \frac{6}{6} \\ (1) & (1) & \end{array}$$

$$I_{016} = 274,8 (\text{\AA})^2; \quad d_{016} = 1,11 \text{\AA}; \quad d_{016} \min = 0,55 \text{\AA}; \quad q = 2; \quad q_2 = 2$$

Vierfach belastete gemischte Ebene.

$\langle 017 \rangle$

$$\begin{array}{ccccc} 2\text{Sr} & 2\text{Sr} & 2\text{SO}_4 & 2\text{SO}_4 & 2\text{Sr} \\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{3}{6} & \frac{4}{6} & \frac{6}{6} \\ (1) & (2) & (1) & (2) & \end{array}$$

$$I_{017} = 318,8 (\text{\AA})^2; \quad d_{017} = 0,96 \text{\AA}; \quad d_{017} \min = 0,16 \text{\AA}; \quad q = 2$$

Doppelt belastete einfache Ebene.

$\langle 018 \rangle$

$$\begin{array}{ccccc} \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 \\ 0 & \frac{2}{6} & \frac{3}{6} & \frac{5}{6} & \frac{6}{6} \\ (2) & (1) & (2) & (1) & \end{array}$$

$$I_{018} = 363,0 (\text{\AA})^2; \quad d_{018} = 0,84 \text{\AA}; \quad d_{018} \min = 0,14 \text{\AA}; \quad q_1 = 1 \quad q_2 = 1$$

Doppelt belastete gemischte Ebene.

$\langle 0.1.14 \rangle$

$$\begin{array}{ccccc} \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 \\ 0 & \frac{2}{6} & \frac{3}{6} & \frac{5}{6} & \frac{6}{6} \\ (2) & (1) & (2) & (1) & \end{array}$$

$$I_{0.1.14} = 629,7 (\text{\AA})^2; \quad d_{0.1.14} = 0,48 \text{\AA}; \quad d_{0.1.14} \min = 0,08 \text{\AA}; \quad q_1 = 1; \quad q_2 = 1$$

Doppelt belastete gemischte Ebene.

$\langle 101 \rangle$ (102)

Sr	SO ₄	SO ₄	Sr	SO ₄	Sr	Sr	SO ₄
0	$\frac{1}{24}$	$\frac{6}{24}$	$\frac{7}{24}$	$\frac{9}{24}$	$\frac{15}{24}$	$\frac{16}{24}$	$\frac{22}{24}$
(1)	(5)	(1)	(2)	(6)	(1)	(6)	

$$I_{101} = 57,90 (\text{\AA})^2; \quad d_{101} = 5,29 \text{\AA}; \quad d_{101} \min = 0,22 \text{\AA}; \quad q = 1$$

Einfach belastete einfache Ebene.

$\langle 102 \rangle$ (104)

Sr	SO ₄	Sr	SO ₄	SO ₄	Sr	SO ₄	Sr
0	$\frac{2}{24}$	$\frac{3}{24}$	$\frac{6}{24}$	$\frac{17}{24}$	$\frac{20}{24}$	$\frac{21}{24}$	$\frac{23}{24}$
(2)	(1)	(3)	(11)	(3)	(1)	(2)	

$$I_{102} = 96,83 (\text{\AA})^2; \quad d_{102} = 3,16 \text{\AA}; \quad d_{102} \min = 0,13 \text{\AA}; \quad q = 1$$

Einfach belastete einfache Ebene.

$\langle 110 \rangle$ (120)

Sr	Sr	SO ₄	SO ₄	Sr	Sr	SO ₄	SO ₄
0	$\frac{3}{24}$	$\frac{6}{24}$	$\frac{9}{24}$	$\frac{12}{24}$	$\frac{15}{24}$	$\frac{18}{24}$	$\frac{21}{24}$
(1)	(1)	(1)	(1)	(1)	(1)	(1)	(1)

$$I_{110} = 67,93 (\text{\AA})^2; \quad d_{110} = 4,51 \text{\AA}; \quad d_{110} \min = 0,57 \text{\AA}; \quad q = 1$$

Einfach belastete einfache Ebene.

$\langle 210 \rangle$ (110)

2SrSO ₄	2SrSO ₄	2SrSO ₄
0	$\frac{18}{24}$	$\frac{24}{24}$
(3)	(1)	

$$I_{210} = 92,99 (\text{\AA})^2; \quad d_{210} = 3,29 \text{\AA}; \quad d_{210} \min = 0,82 \text{\AA}; \quad q_1 = 2; \quad q_2 = 2$$

Vierfach belastete gemischte Ebene.

$\langle 111 \rangle$ (122)

Sr	SO ₄	Sr	SO ₄	SO ₄	Sr	SO ₄	Sr
0	$\frac{1}{24}$	$\frac{3}{24}$	$\frac{9}{24}$	$\frac{10}{24}$	$\frac{16}{24}$	$\frac{18}{24}$	$\frac{19}{24}$
(1)	(2)	(6)	(1)	(6)	(2)	(1)	

$$I_{111} = 81,38 (\text{\AA})^2; \quad d_{111} = 3,77 \text{\AA}; \quad d_{111} \text{ min} = 0,16 \text{\AA}; \quad q = 1$$

Einfach belastete einfache Ebene.

$$\begin{array}{cccc} \langle 211 \rangle & (111) & \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 \\ & & 0 & \frac{4}{24} & \frac{6}{24} & \frac{10}{24} \\ & & (2) & (1) & (2) & \end{array}$$

$$I_{211} = 103,22 (\text{\AA})^2; \quad d_{211} = 2,97 \text{\AA}; \quad d_{211} \text{ min} = 0,25 \text{\AA}; \quad q_1 = 1; \quad q_2 = 1$$

Doppelt belastete gemischte Ebene.

$$\begin{array}{cccccccc} \langle 112 \rangle & (124) & & & & & & \\ \text{Sr} & \text{Sr} & \text{SO}_4 & \text{Sr} & \text{SO}_4 & \text{SO}_4 & \text{Sr} & \text{SO}_4 \\ 0 & \frac{11}{24} & \frac{14}{24} & \frac{15}{24} & \frac{17}{24} & \frac{18}{24} & \frac{20}{24} & \frac{21}{24} \\ (11) & (3) & (1) & (2) & (1) & (2) & (1) & \end{array}$$

$$I_{122} = 287,1 (\text{\AA})^2; \quad d_{112} = 1,04 \text{\AA}; \quad d_{112} \text{ min} = 0,043 \text{\AA}; \quad q = 1$$

Einfach belastete einfache Ebene.

$$\begin{array}{cccc} \langle 213 \rangle & (113) & & \\ \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 \\ 0 & \frac{6}{24} & \frac{12}{24} & \frac{18}{24} \\ (1) & (1) & (1) & \end{array}$$

$$I_{213} = 163,5 (\text{\AA})^2; \quad d_{213} = 1,87 \text{\AA}; \quad d_{213} \text{ min} = 0,47 \text{\AA}; \quad q_1 = 1; \quad q_2 = 1$$

Doppelt belastete gemischte Ebene.

$$\begin{array}{cccc} \langle 235 \rangle & (135) & & \\ \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 & \text{SrSO}_4 \\ 0 & \frac{2}{24} & \frac{6}{24} & \frac{20}{24} \\ (1) & (2) & (7) & \end{array}$$

$$I_{235} = 291,6 (\text{\AA})^2; \quad d_{235} = 1,05 \text{\AA}; \quad d_{235} \text{ min} = 0,088 \text{\AA}; \quad q_1 = 1; \quad q_2 = 1$$

Doppelt belastete gemischte Ebene.

$\langle 516 \rangle \quad (5.2.12)$

Sr	Sr	SO ₄	SO ₄	Sr	Sr	SO ₄	SO ₄
0	$\frac{3}{24}$	$\frac{6}{24}$	$\frac{9}{24}$	$\frac{12}{24}$	$\frac{15}{24}$	$\frac{18}{24}$	$\frac{21}{24}$
	(1)	(1)	(1)	(1)	(1)	(1)	(1)

$$I_{516} = 330,5 (\text{\AA})^2; \quad d_{516} = 0,92 \text{\AA}; \quad d_{516} \min = 0,11 \text{\AA}; \quad q = 1$$

Einfach belastete einfache Ebene.

Wenn wir die graphischen Darstellungen der Abbildungen 2 und 3 zentralisieren, so stellen wir fest (Abb. 4) dass es Gitterebenen gibt, deren Bauprinzipien identisch oder sehr ähnlich ausfallen. Zum Beispiel (110) und (100), oder (210) und (010).

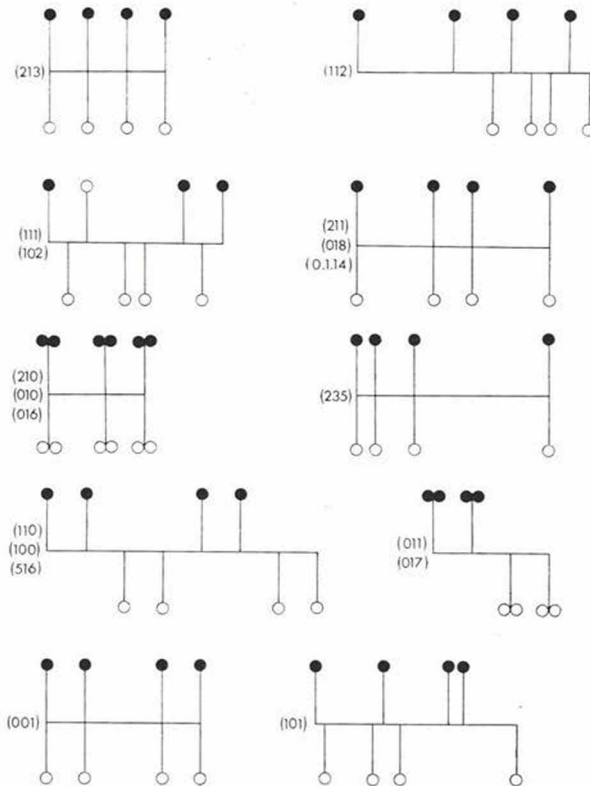


Abb. 4.

Auf Grund dieser Ähnlichkeiten bei den von uns untersuchten Cölestin-Kristalle des Siebenbürger Beckens können zehn Haupttypen aufgestellt werden, von denen vier Typen einfach belastete einfache Ebenen sind, ein Typus doppelt belastete einfache Ebene, vier Typen doppelt belastete gemischte Ebene und ein Typus einfach belastete gemischte Ebene darstellen.

In Zusammenhang mit den Abbildungen 2 und 3 müssen wir erwähnen, dass sie nicht einem absoluten Masstab ausgeführt sind, sondern nach einem relativen, weil einige Gitterebenen sich auf sehr kleinen Abständen wiederholen (zB. 0,04 Å), andere auf recht grossen Abständen (zB 2,46 Å), was die Beibehaltung eines durch gehenden Masstabs bei allen Abbildungen nicht ermöglicht. Aus diesen Grund haben wir zwischen den Gitterebenen derselben Serie ihre Abstände in Ziffern angegeben. Dasselbe kann man über die L-Werte sagen, die durch parallele Linien zu der Ordinatenasche dargestellt sind.

Die Darstellungen aus Abb. 4 sind schematisch und repräsentieren das Bauprinzip der Gitterebenen.

Gittergeraden

Die Abstände zwischen den Partikeln (Massenteilchen) in irgendwelcher Richtung des Kristallgitters haben wir mit folgender Formel berechnet:

$$T = \sqrt{u^2 a^2 + v^2 b^2 + w^2 c^2},$$

wo a , b , c die Kanten der Elementarzelle sind.

Bei den Hauptzonen der von uns untersuchten Kristalle erhielten wir die Werte der Tabelle 6.

Tabelle 6.

	Symbol d. Zonen		Parameter auf d. betr. Gittergeraden in Å
	neu	alt	
1	[010]	[010]	5,36
2	[001]	[001]	6,84
3	[100]	[100]	8,36
4	[011]	[011]	8,69
5	[110]	[210]	9,93
6	[101]	[201]	10,81
7	[111]	[211]	12,06
8	[120]	[110]	13,60
9	[121]	[221]	15,22
10	[122]	[111]	19,28
11	[241]	[441]	28,03

III. Der Zusammenhang zwischen Morphologie und Gitterstruktur

Im einleitenden Teil erwähnten wir, dass es bei der Untersuchung der Beziehung zwischen Morphologie und innerer Struktur zwei wesentliche Seiten gibt, nämlich die äussere Form und die Gitterstruktur. Indem wir die Werte D , T , S und D_z einführten, konnten wir die Morphologie aus jedem Gesichtspunkt charakterisieren. Was die zweite Seite des Problems betrifft, diese ist der andern sowohl an Genauigkeit, als auch methodologisch voraus.

Im Prinzip stellt also die Beziehung zwischen Morphologie und Gitterstruktur keine Schwierigkeiten. Trotzdem müssen wir erwähnen, dass gegenwärtig beide Seiten gut bekannt aber *unabhängig voneinander* sind.

Bis heute hat man nicht mit Genauigkeit festgestellt, welcher Faktor den vorrangigen Einfluss auf den Habitus des Kristalls hat. Forschungen in dieser Richtung sind zahlreich, aber aus Diskussionen geht hervor, dass die verschiedenen Hypothesen nicht einen allgemeinen Charakter haben und dass sie einander widersprechende Resultate geben.

Es ist interessant, dass sich ein grösser Teil der Untersuchungen auf diesem Gebiet auf Substanzen des kubischen System bezieht oder auf solche von hoher Symmetrie, mit einem relativ einfachen und formenarmen Kristall.

Im seiner Arbeit „Baugesetze kristalliner Materie“ bestätigt P. Niggli (1926a), dass der wichtigste strukturelle Faktor der Abstand zwischen den Partikeln längs der Gittergeraden ist. Je kleiner diese Abstände sind, eine umso grössere Bedeutung hat die Gittergerade. Niggli schreibt in dieser Arbeit: „Die Kristallflächen der Zone einer Hauptbindungsrichtung der Struktur gehören zu den relativ langsam wachsenden Begrenzungselementen, sie sind daher häufig zu erwarten. Die bevorzugten Zonenachsen, denen die (einen gewachsenen Kristall abschliessenden) Flächen angehören, geben uns die Hauptrichtungen der strukturellen Baugruppen- und Atomanordnung an.“ (S. 81).

„Wir sagen daher besser: Den Hauptzonen der äusseren Kristallmorphologie gehen diejenigen ausgezeichneten strukturellen Richtungen (d. h. Richtungen kurzer Abstände zwischen Massenteilchen oder Baugruppenschwerpunkten) parallel, welche bei der Kristallisation besonders wirksam waren.“ (S. 82).

In einer anderen Arbeit (1926b) schreibt Niggli: „Alle Hauptzonen und wichtigen Nebenzonen sind dicht besetzten Gittergeraden“ parallel. Alle Hauptflächen gehen mehreren solcher Gittergeraden parallel und stehen auf keiner von ihnen senkrecht“ (S. 305 – 307).

„Die Erscheinungen an Quarz zeigen somit mit aller Schärfe, dass nicht die Belastungsverhältnisse der Gitterebenen, sondern die Belastungsverhältnisse der Gittergeraden die äussere Morphologie bestimmen. Die Zonenbeziehungen sind das Primäre, die Flächenlage das Sekundäre“ (S. 308).

Auf den ersten Blick scheint Niggli's Hypothese das Problem der

Beziehung Morphologie-Struktur zu lösen. Parallel mit den Hauptentwicklungsrichtungen erscheinen Flächen mit einem langsamen Wachstum und grosser Persistenz, also dominante Flächen. Die von uns bestimmten Dominationswerte (D) widerspiegeln genau diese Lage. Daher die Schlussfolgerung, dass diese Richtungen grosse Wachstumsgeschwindigkeit darstellen. Aus geometrischen Erwägungen geht hervor, dass senkrecht zu Richtungen mit grosser Wachstumsgeschwindigkeit Flächen untergeordneter Grösse erscheinen, während parallel zu ihren grosse, dominante Flächen auftreten.

Niggli's Hypothese hat den grossen Nachteil, dass sie aus der äusseren Form abgeleitet wurde. Niggli ist also genau umgekehrt vorgegangen, aus der äusseren Form hat er die Hauptgittergeraden gefolgert, anstatt die äussere Form aus der Gitterstruktur abzuleiten. Der zweite Satz des ersten Zitates zeigt klar diesen umgekehrten Vorgang.

Wenn Niggli's Verfahren (Bedeutung der Gitterreihen mit kleinen Parametern) beim Quarz einige Ergebnisse gezeigt hat, so kann es beim Cölestin nicht in seiner ursprünglichen Form angewendet werden. Wir müssen erwähnen, dass die Hypothese nicht einmal beim Quarz allgemein gültig ist.

Die von uns untersuchten Cölestin-Kristalle zeigten verschiedenen Habitustypen. Es gibt tafelige Kristalle nach $[001]$ und verlängert nach der Achse b . In diesem Fall bestätigt sich Niggli's Theorie, weil $[010]$ die entwickelteste Zone ist, während der Parameter in der Richtung der Gittergerade $[010]$ der kleinste ist ($5,36 \text{ \AA}$).

Ein anderer Habitus – häufiger als der erste – ist der in Richtung der Achse a verlängerte und mit einer betonten Entwicklung der Zone $[100]$. Die Achse der Zone $[100]$ hat den Parameter ($8,36 \text{ \AA}$) grösser als $[010]$. In diesem Fall könnte man aus der äusseren Form den Schluss ziehen, dass die Richtung $[100]$ die wichtigste ist, was im Widerspruch mit Niggli's Hypothese ist.

Wenn wir in Betracht ziehen, dass die Zone $[001]$ bei den von uns untersuchten Cölestin-Kristallen eine Bedeutung der Ordnung 8 hat, ist es umso klarer, dass Niggli's Hypothese nicht verallgemeinert werden kann. Der Abstand zwischen den Teilchen längs der Achse $[001]$ beträgt $6,84 \text{ \AA}$!

Die Nichtanwendbarkeit der Theorie Niggli's für die Cölestin wird auch durch die g -Werte illustriert. Der g -Wert charakterisiert die Bedeutung der Zonen. Aus Tab. 5 geht hervor, dass die Zone $[001]$ auf Grund der g -Werte eine Bedeutung der Ordnung 6 hat, obwohl die Zonen-Achse $[001]$ einen Parameter aufweist der sie auf den zweiten Platz laut Niggli's Theorie setzt. Anders ausgedrückt wurde Niggli's Hypothese bezüglich der Gitterreihen durch die von ihm eingeführten g -Werte in Abrede gestellt. In diesem Fall die g -Werte wurden aus der Form der Kristalle abgeleitet, die Parameter der Gittergerade wurden aus den strukturellen Daten berechnet. Die zwei Seiten des Problems sind also in Ordnung, die Schlussfolgerungen schliessen sich aber gegenseitig aus. Es ist klar, dass die Methode umgekehrt werden muss, aus der Gitter-

struktur muss auf die äussere Form gefolgert werden die der Ausdruck des inneren Aufbaus ist.

Unsere Untersuchungen an den Cölestin-Kristallen des Siebenbürgischen Beckens bestätigten gewissermassen die Richtigkeit von Niggli's Feststellung, dass die Belastung der Gitterebenen nicht der ausschlaggebende Faktor bei der Bildung des Habitus der Kristalle sein kann. Aus diesem Gesichtspunkt müssen wir die Bemerkung machen, dass *die Belastung der Gitterebene als solche* keinen ausschlaggebenden Faktor darstellt.

Trotz aller aufgezeigten Schwächen ist Niggli's Idee im Vergleich zu anderen besser. Indem man das Prinzip Niggli's auf den *Identitätsabstand zwischen den Gitterebenen* anwendet und das Bauprinzip der Gitterebenen in Betracht zieht, erhält man wirklichkeitsgetreuere Resultate.

Nehmen wir an, dass ein kleiner Abstand zwischen den Massenteilchen entlang einer beliebigen Richtung eine grosse Wachstumsgeschwindigkeit voraussetzt (Niggli), dann sichern die grossen Abständen zwischen den Gitterebenen eine kleine Wachstumsgeschwindigkeit in senkrechter Richtung auf diese Ebenen voraus. Je grösser der Identitätsabstand in einer beliebiger Richtung ist, desto grösser sind die der senkrechten Ebenen auf diese Richtung.

Aus Tabelle 7. geht hervor, dass der grösste Identitätsabstand (5.29 Å) zwischen der Ebenen der Serie (101) besteht, also in senkrechter Richtung auf diese Ebene. Es folgen (011), (100), (111), (001), (210), (102), (211), (010), und (110), also genau (ausgenommen (010) dieselben Formen, welche beim Cölestin des Siebenbürgischen Beckens auch in dominieren der Grösse auftreten können.

Tabelle 7.

	Index		Ident. Abstand (Å)
	neu	alt	
1	(101)	(102)	5,29
2	(011)	(011)	4,22
3	(100)	(100)	4,18
4	(111)	(122)	3,77
5	(001)	(001)	3,42
6	(210)	(110)	3,29
7	(102)	(104)	3,16
8	(211)	(111)	2,97
9	(010)	(010)	2,68
10	(110)	(120)	2,25
11	(235)	(135)	1,05
12	(112)	(124)	1,04
13	(017)	(017)	0,96
14	(016)	(016)	0,55
15	(0.1.14)	(0.1.14)	0,48
16	(213)	(113)	0,47
17	(516)	(5.2.12)	0,46
18	(018)	(018)	0,42

Auf Grund der *D*-Werte (siehe Tabelle 4) ist die Reihenfolge der Bedeutung der Formen: (011), (001), (210), (101), (100), (102), (111), (110) und (211).

Zwischen der Bedeutungsordnung auf Grund des Identitätsabstand (strukturelle Seite) und der auf Grund der *D*-Werte bestimmten (morphologische Seite) gibt es Unterschiede. Bei der Form (011) beträgt diese Differenz eine Einheit, bei (001) drei, bei (210) drei, bei (101) drei, bei (100) zwei, bei (102) eine, bei (111) drei, bei (110) zwei, bei (211) eine Einheit. Wir stellen fest, dass die Differenzen höchstens drei Einheiten betragen.

Die Identitätsperiode ist aber nur einer der strukturellen Faktoren. Ein anderer sehr wichtiger Faktor ist das Bauprinzip der Gitterebenen. Wenn wir auch diesen Faktor in Betracht ziehen, lässt sich die Differenz zwischen der zwei Bedeutungsordnungen leicht erklären.

Obwohl zwischen den Ebenen (101) die grösste Identitätsperiode ist, hat sie in der Morphologie eine Bedeutung vierter Ordnung, weil die Serie aus *einfach belasteten Ebenen besteht*.

Die Form (011) hat eine Bedeutung erster Ordnung in der Morphologie, weil diese Serie eine grosse Identitätsperiode hat und aus *doppelt belasteten Ebenen besteht*.

Genauso erklärt sich die Differenz bei der Form (001). Auf Grund der Identitätsperiode belegt sie den fünften Platz, aber weil sie doppelt belastete Ebenen hat, muss ihre Bedeutung grösser sein. In der Morphologie hat sie tatsächlich eine Bedeutung zweiter Ordnung!

Auch die Differenz von drei Einheiten bei der Form (210) lässt sich erklären. Obwohl zwischen der Serie der Gitterebenen (210) die Identitätsperiode kleiner ist, *ist ihre Belastung vierfach* und das verleiht ihr in der Morphologie eine Wichtigkeit dritter Ordnung.

Die Differenzen von drei Einheiten bei der Form (111) erklären sich ebenfalls durch die Tatsache, dass die Serie aus einfach belasteten Ebenen besteht.

Die übrigen Differenzen betragen 1 bis 2 Einheiten.

Abbildung 4 ist die graphische Darstellung von Gitterebenen nach Gruppen identischer oder ähnlicher Bauprinzipien.

Ein Studium dieser Abbildung führt zu interessanten Feststellungen, wenn wir die verschiedenen Gitterebenen im Rahmen der gleichen Gruppe vergleichen.

Die Ebenen (210), (010), und (016) haben dasselbe Bauprinzip. In der Morphologie hat (210) eine Bedeutung dritter Ordnung, während (010) und (016) eine fast vernachlässigbare Bedeutung haben. Die kleinen Werte der Identitätsperiode für diese zwei letzten Formen erklären die grosse Differenz zu (210).

Die Ebenen (110) und (100) gehören zur selben Gruppe, die höhere Identitätsperiode der Serie (100) gibt ihr aber eine höhere Bedeutung, als (110).

Die Ebenen (011) und (017) haben dasselbe Bauprinzip, aber die sehr kleine Identitätsperiode (0,96 Å) von (017) verhindert ein betonteres Verhalten der Form in der Morphologie.

Lehrreich ist auch ein Vergleich der Formen (016), (017) und (018). Diese Formen erscheinen in derselben Zone und sind auf dem Kristall benachbart. Sie zeigen drei Typen von Gitterebenen. Auf dem Kristall erscheinen die zwei letzten ausnahmslos als Flächen untergeordneter Grösse, während die erste in einigen Fällen auch als Übergangsgrösse auftreten kann.

Auf Grund der Identitätsperiode wäre die Bedeutungsordnung: (017), (016) und (018). Ziehen wir aber den Bau der Gitterebenen in Betracht, so lässt sich die Tatsache, dass (016) auch als Übergangsgrösse auftritt, erklären: die Ebenen (016) sind *vierfach belastet*!

Der kleinen Dimensionen der Formen (017) und (018) wegen konnten wir keine Ordnung der morphologischen Bedeutung zwischen ihnen aufstellen, aber wenn wir auch den Bau der Gitterebenen in Betracht ziehen, können wir behaupten, dass die doppelt belasteten (017) Ebenen eine grössere Bedeutung haben, als (018), deren Ebenen einfach belastete sind. Die reelle Bedeutungsordnung dieser drei Formen ist: (016), (017) und (018).

Zusammenfassend können wir sagen, dass Niggli's Prinzip anwendbar ist, aber nicht auf die Zonenachsen, sondern auf die Identitätsperiode angewendet (senkrechte Richtungen auf die Gitterebenen) und nicht ausschliesslich, sondern verbunden mit dem Bauprinzip der untersuchten Gitterebenen. Wenn man nur mit der Identitätsperiode, oder nur mit dem Bauprinzip der Gitterebenen arbeitet, erhält man keine realen Resultate.

Zum Schluss müssen wir erwähnen, dass im ersten Kapitel dieser Arbeit für die Bezeichnung der Formen und Zonen alte Symbole verwendet wurden, welche aus dem morphologischen Achsenverhältnis $a : b : c = 0,781 : 1 : 1,28$ abgeleitet wurden.

In den Kapiteln II und III verwendeten wir die neuen Symbole, abgeleitet aus der strukturellen Achsenverhältnissen. Um die zwei Notierungen vergleichen zu können, wurde im ersten Teil des II Kapitels sowohl die alte, wie auch die neue Notierung verwendet (die alte in geraden Klammern, oder in den Tabellen wurde darauf hingewiesen, welche die alte Notierung ist).

LITERATUR

- Benkő, G. (1885): Ein neues Vorkommen von Cölestin und Baryt in Siebenbürgen, Orv. Term. Tud. Ért. 10.
 Chudoba, K. (1930): Zur morphologischen Typisierung der verschiedenen Kristalltrachten, C. Bl. Min. Abt. A.
 Goldschmidt, V. M. (1923): Beitr. Krist. 2, 29.
 Imreh, J. (1964): Noi valori cristalografice pentru caracterizarea habitusului și importanței zonelor. Stud. Cerc. Geol. 1, 9.

- Imreh, J. (1957): Noua ocurenta cu celestina de la Cluj si Dumbrava, Bul. Univ. Babes-Bolyai, ser. St. Nat. 11, 1-2.
- Imreh, J. (1957): Noi cristale de celestina de la Baci, Stud. Cerc. Geol. Geogr. 8, 3-4.
- Imreh, J. (1957): A cölesztin újabb előfordulása Koppándon, Földt. Közl. 87, 1.
- Imreh, J. (1957): Cristale de celestina de la Sandulesti, Stud. Cerc. Geol. Geogr. 8, 1-2.
- James, R. W. and Wood, W. A. (1925): The Crystal Structure of Baryte, Celestine and Anglesite, Proc. Roy. Soc. A.
- Koch, A. (1888): Ein neues Cölestin- und Baryt Vorkommen in der Nähe von Torda in Siebenbürgen, TMPM 9.
- Koch, A. (1889): Ergänzende Beobachtung über des Cölestin- und Baryt-Vorkommen bei Torda in Siebenbürgen, TMPM, 10.
- Niggli, P. (1926a): Baugesetze kristalliner Materie, Z. Krist. 63.
- Niggli, P. (1926b): Beziehungen zwischen Struktur und äussere Morphologie am Quarz, Z. Krist. 63.
- Niggli, P. (1941): Lehrbuch der Mineralogie und Kristallchemie.
- Schilly, W. (1933): Zusammenhänge zwischen Morphologie, Struktur und Genesis bei Cölestin, N. Jb. Miner. Beil. Bd. 67.
- Stoicovici, E. et Gliszezinski, S. (1936): Mineraux de genèse hydrothermale à Cluj, Compt. Rend. Ac. Sc. Roum. 1, 4.
- Szádeczky, K. Gy. (1889): Beiträge zur Mineralienkenntniss Siebenbürgens, Orv. Term. Tud. Ért. 14.
- Szádeczky, K. E. (1923): Új cölesztin előfordulás Szindröl. Föld. Közl. 53.
- Zimányi K. (1888): Die kristallographischen Verhältnisse des Barytes und Cölestins von Dobogó-Berge, Mat. Term. Tud. Ért. 6.